

[巻頭言]

サイバーサイエンスセンターと基礎科学としてのコンピュータサイエンス

理学研究科 河野裕彦

私は東北大学理学研究科在学中以来長い間、熱や光によって励起された分子がどのように反応するかを理論的にまたコンピュータを使って明らかにすることに携わってきました。化学反応を時間的・空間的な視点も含めて本質的に理解する上では、コンピュータの力は不可欠で、この分野はコンピュータケミストリーとよばれています。それは量子力学のシュレーディンガー方程式を解いて、分子の構造やその電子的エネルギーを算出する量子化学からはじまり、現在ではタンパク質など巨大な生体分子にまで適用されています。また、時々刻々と変化していく分子中の原子の位置を追跡し、化学結合がどのように組み変わって反応が進行していくのかをシミュレーションすることもできるようになりました。電子励起状態間を乗り移る非断熱遷移が関与する反応も追跡できるようになりました。分子動力学や反応動力学とよばれる分野です。以上のような分野の展開は、コンピュータの計算速度や周辺機器、入出力インターフェースなどのハード面での劇的な発展と量子化学や動力学計算のソフトウェアの充実によって加速され、量子化学計算(1998年)と分子動力学(2013年)の分野でノーベル賞が授与されています。

1970年代中頃の学生時代に片平地区の大型計算機センター(現在のサイバーサイエンスセンター)で、パンチカードに穴をあけ、プログラムの一行一行をカードリーダーに入れていた頃とは隔世の感があります。当時は情報教育整備の萌芽期であり、Fortran 言語の習得からプログラミングまでほとんど自己流でした。単純な級数和の桁落ちなどでも苦労したことを覚えています。数値計算の技法についての情報も少なく、ユーザーとして直面する問題を経験を積み上げながら一つ一つ解決して行くという効率的とは言えない時代でした。今のコンピュータをとりまく環境や情報はユーザーフレンドリーで、コンピュータへの関心を低くすることに大いに貢献しています。サイバーサイエンスセンターもこの点に重きを置き、グラフィカルソフトウェアの導入や様々な講習会の開催などを進めてこられました。私たちの研究グループも一般ユーザーとしてその恩恵に長い間浴してきました。数値計算プログラムの高速化・並列化に対する助言や支援など、枚挙にいとまがありません。あらためて感謝申し上げます。

最近では、並列計算機だけではなく、分子を構成する個々の原子の動きを三次元動画で立体的に見ることができるセンターの可視化機器室にある「三次元可視化システム」を利用させていただくようになりました。様々な可視化機能のモジュールを可視化ソフト AVS のフローチャートの上で組み合わせることによって、簡単に三次元の動画が作れます(菱沼 直樹ら、「DNA 鎖切断の反応動力学シミュレーションと AVS/Express を用いた三次元可視化」、SENAC Vol. 50 No. 1, pp. 3-12 参照)。奥行きを視覚的に捉えられる三次元動画を使えば、化学になじみのない人でも、DNA の二重らせん構造やラジカルによる鎖切断の様子など複雑な系の反応を時間的・空間的に理解できます。センターの協力のもと得られた成果は、毎年のオープンキャンパスでの模擬授業「飛び出すデジタル 3D 映像でミクロの世界を体感しよう! ~DNA 鎖切断や分子モーターの動画公開~」などで公開してきました。

コンピュータがもたらすインパクトは化学の分野に限ったことではなく、現在では、理工系、文系のあらゆる領域でコンピュータを利用した新しい研究分野が展開あるいは確立されていると思います。それは単にハードの整備やソフトの充実だけではなく、汎用計算機創造の基礎概念

そのものが事象の本質を抽出する新たなモデル化やアルゴリズムの創成につながっていたからだと思います。コンピュータの概念そのものが科学全般に及ぼす影響は、おそらく、私がコンピュータに関わり始めた1970年代の遙か以前からはじまっており、今後もコンピュータサイエンスはその価値観や普遍性を様々な分野と共有しながら発展していくことでしょう。今になると、コンピュータサイエンスが私に与えた最も大きな影響は、コンピュータ自体やその周辺のハード的な能力ではなく、“何をどう考えるか”という問いに答える論理的な構想力ではなかったかと思います。実践的にコンピュータサイエンスを学ぶことによって、問題設定、モデル構築における必要十分条件の整理、データ処理、数値計算結果の妥当性の検討、論理破綻の検証、間違い探しなどを筋道立てて行えるようになってきました。コンピュータサイエンスの神髄は形而上学的な側面を持つ数学と形而下的な自然科学や工学に新たな展開を促し、それらの間の橋渡しを可能とする基礎科学の側面にあるのではないのでしょうか。一般ユーザーも、コンピュータサイエンスを単なる α の科目として学ぶのではなく、基幹的な基礎科学としてその最先端まで学ぶ姿勢が必要かもしれません。サイバーサイエンスセンターにはこれからも拡大する情報科学のフロンティアを紹介していただき、ユーザーがトップレベルの研究を続けられるように支援していただきたいと思っています。

センターからの支援を具体化する手段としては、相談員制度があります。様々なバックグラウンドを持つ相談員を配置して、ユーザーの疑問に答えていただいています。十分な知識が無いユーザーでも専門的知識を得ながら目的を達成でき、この制度によって多くのユーザーが助けられたことと思います。私も学生時代、相談員の方々にプログラミングからその実行まで徹に入り細にわたり多くのことを教えていただきました。私の研究室からもこれまで何人かが相談員を務め、一般的なプログラミングから量子化学計算ソフトの使い方までを教えてくださいましたが、これに関連しては反省もあります。相談される方に前もって必要な背景や情報をもっと知っていただくべきだったということです。量子化学計算には様々なパッケージプログラムがあり、分子の安定構造の決定が得意なもの（Gaussian が最も有名）、あるいは電子励起状態のエネルギー算出が得意なもの（Molpro、Molcas、…）など様々です。また、計算精度も計算方法（密度汎関数法や多配置型電子相関理論など）に依存し、相談者にはどのレベルを要求するのか認識していただく必要があります。実際にどのような道筋で最終的な結果にたどり着けるかに関する情報を相談者に事前に提供していれば、より円滑に相談が進むのではないかということです。簡単どころでは、化学の様々な計算プログラムを使うとどのようなことができるのかを整理したリンク集の作成から始めることが考えられます。私たちもサイバーサイエンスセンターの発展に少しでも寄与できるように尽力したいと思います。

私は過去40年のコンピュータを取り巻く環境のめざましい変化を経験してきました。サイバーサイエンスセンターには時代に応じて様々な任務が課せられてきましたが、現在ではネットワーク管理やセキュリティ確保という重大な任務もあります。今後も、サイバーサイエンスセンターが計算科学の拠点として、学生をはじめとする一般ユーザーがコンピュータやネットワークを有効に活用できる環境を整備し続けていただければと願っています。これからはAIなども広まり、予測不能な異次元の世界に入っていきます。どのような移り変わりがあろうとも、コンピュータサイエンスは既存の学問の発展のみならず分野横断的な新しい学問の創生にも不可欠だと思います。そのための基幹組織であるサイバーサイエンスセンターが全学の支援のもと、ますます発展していけることを祈ります。